



TITLE:

II-2 Transition-metal
pseudopotential法による液体金属
の電子状態の研究(液体金属の構造
と物性,基研研究会報告)

AUTHOR(S):

松浦, 満

CITATION:

松浦, 満. II-2 Transition-metal pseudopotential法による液体金属の電子状態の研究(液体金属の構造と物性,基研研究会報告). 物性研究 1970, 14(6): B25-B26

ISSUE DATE:

1970-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88134>

RIGHT:

$$\begin{array}{c} l \\ \diagup \\ \text{triangle} \\ \diagdown \\ n \quad m \end{array} = g_3(R_n, R_m, R_l) \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{W}_4(R_{nm}) &= \begin{array}{c} l_1 \quad l_2 \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{square} \\ \diagdown \quad \diagup \\ n \quad m \end{array} + \begin{array}{c} l_1 \quad l_2 \\ \text{square} \\ n \quad m \end{array} + \begin{array}{c} l_1 \\ \diagup \\ \text{triangle} \\ \diagdown \\ n \quad m \\ l_2 \end{array} \\
 &= (\rho\xi)^2 \int \left[\tilde{u}(R_{nm}) \tilde{u}(R_{nl_1}) \tilde{u}(R_{l_1l_2}) \tilde{u}(R_{l_2m}) \right. \\
 &\quad \times \left\{ \frac{V(R_{nl_1}) V(R_{l_1l_2}) V(R_{l_2m})}{z^3} + \frac{V(R_{nm})}{z} \right\} \\
 &\quad \left. + \tilde{u}(R_{nl_1}) \tilde{u}(R_{l_1m}) \tilde{u}(R_{nl_2}) \tilde{u}(R_{l_2m}) \frac{V(R_{nl_1})}{z} \frac{V(R_{l_1m})}{z} \right] \\
 &\quad \times g_4(R_n, R_m, R_{l_1}, R_{l_2}) dR_{l_1} dR_{l_2} \quad (16)
 \end{aligned}$$

$\tilde{W}_n(R)$ まで含めると、局所的な n 体相関が全て考慮されることになる。高次の相関も、上記の方法で逐次とり入れることにより、イオン配置の局所的な秩序を含め得る。詳しい数値計算は目下進行中である。

II-2 Transition-metal pseudopotential 法による 液体金属の電子状態の研究

東北大・理 松 浦 満

最近 Harrison により、 d レベルの存在の効果（いわゆる $s-d$ hybridization）を、あらわにとりいれるよう拡張された transition-metal pseudopotential をもとにして、液体金属の電子的性質に d レベルの存在が

如何なる効果をもたらすかを検討してみたい。水銀の電子的性質には d レベルの位置が大きな効果をもたらすと考えられている。又、従来、単純な金属として扱われていた重いアルカリ金属では、比較的フェルミ面の近づくに d レベルがあり、それが圧力をかけるとともに低いエネルギーに下ってくる事が知られており、この事は融解の問題とも関連していると考えられる。これらのような問題を考える際に、d レベルの効果が表面に出された取扱いは有効である。以下、現在、主に検討してみたいと考えている事をあげる。

- 1) 電気抵抗, 熱起電力, Knight shifts など液体金属の電子状態に d レベルの存在 (時に, フェルミレベルに相対的な位置) がどのような効果をもたらすか。
- 2) transition-metal pseudopotential を摂動で扱えるとする, 単純な pseudopotential の場合になされているのと同様に, 電子による間接的な効果を含んだ有効イオン間相互作用が定義出来るが, それはどのような意味を持つか, 定性的・定量的な検討をする。
- 3) 高圧下では, 内殻エネルギー, d レベルのエネルギーのシフトにより pseudopotential が変化する事を伝導電子の遮蔽効果の変化とともに考慮し, 高圧下で液体金属の電子的性質, 有効イオン間相互作用がどのように変化するか。

Ⅱ-1 液体金属の格子模型に対するモンテ・カルロ法

東工大・理 米沢 富美子

液体金属原子の高次分布関数を求める方法として, (1) 実験的に求める。(2) 理論的に計算する。(3) 計算機を使って simulate する。の3つが考えられるが, 現在のところ実験的手段からは3体以上の分布関数に対する十分な情報が得られない。一方, 理論的にも, 第一原理から導くことはもちろん標準的な近似法も確立されていない。したがって, 種々の仮定の下に計算機・実験により高次分布関数を計算する方法がいくつか試みられている。